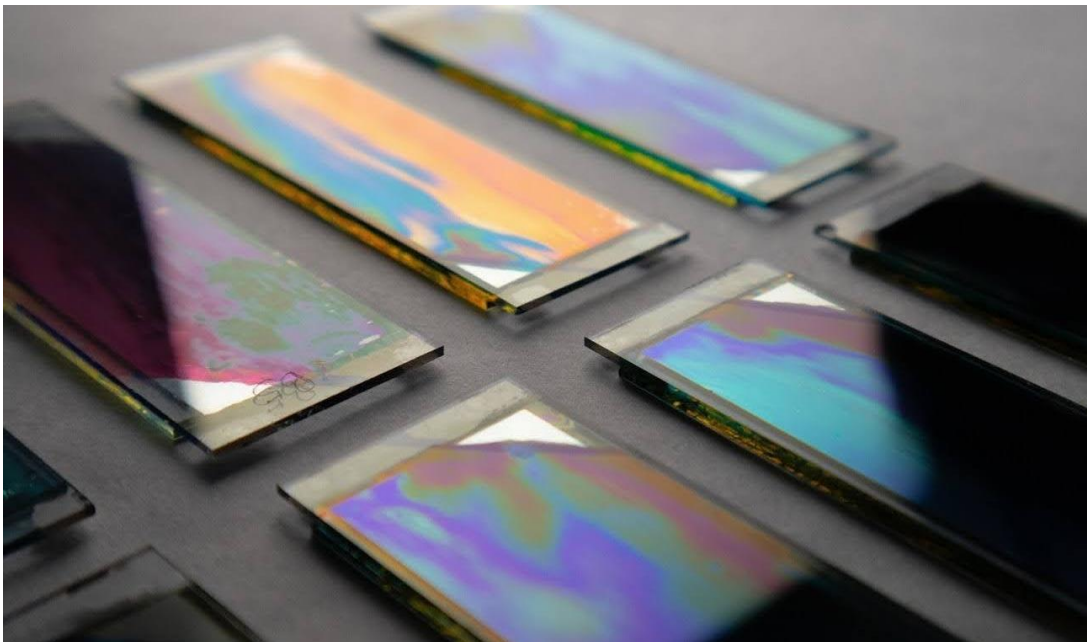


Madrid, miércoles 3 de agosto de 2022

## Un estudio del CSIC elabora un catálogo de reglas de diseño para lograr una tecnología fotovoltaica más eficiente

- Esta clasificación permitirá guiar de forma más precisa la síntesis de nuevas moléculas altamente absorbentes para las celdas solares orgánicas del futuro
- El trabajo propone emplear modelos de aprendizaje automático y aproximaciones semiempíricas que permitan disminuir el gasto computacional de los cálculos



Semiconductores orgánicos en soportes de vidrio | ICMAB-CSIC

Un estudio internacional con participación del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) ha elaborado un catálogo de estrategias para maximizar la absorción de luz de los materiales fotosensibles empleados en las celdas solares orgánicas, en las que los materiales semiconductores encargados de absorber la luz y convertirla en electricidad son moléculas basadas en átomos de carbono. El artículo, liderado por investigadores del Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB-CSIC), el

Imperial College London (Reino Unido) y la Universidad de Linköping (Suecia), ha sido publicado en la revista *Energy and Environmental Science*.

“Conseguir más con menos: este es uno de los hitos más complicados en el campo de la tecnología fotovoltaica orgánica debido a sus implicaciones prácticas: mejorar la eficiencia de las celdas solares, su estabilidad y su semitransparencia para el ojo humano. Esta clasificación, presentada a modo de reglas de diseño, permitirá guiar de forma más precisa la síntesis de nuevas moléculas altamente absorbentes para las celdas solares orgánicas del futuro”, explica el investigador Mariano Campoy, del ICMAB.

Los materiales de carbono de las células solares orgánicas pueden ser polímeros o pequeñas moléculas conjugadas (donde se alternan enlaces simples y dobles del carbono). Este catálogo recopila reglas de diseño para hacer pequeñas moléculas conjugadas más absorbentes, como, por ejemplo, los NFA (del inglés, *non-fullerene acceptors*). Esta nueva familia de materiales semiconductores no derivados del fullereno ha demostrado en laboratorio una eficiencia superior a la del resto de moléculas empleadas. “Sin embargo, las características fundamentales que hacen a los NFA tan buenos absorbentes de luz no han sido todavía estudiadas de forma ordenada y racional, lo cual impide el desarrollo de nuevos materiales más allá del estado del arte actual”, añade Campoy.

Para hacer este estudio, los investigadores construyeron una base de datos computacional formada por más de 3500 moléculas distintas y la emplearon para comparar resultados experimentales en términos de capacidad de absorción de luz. “Gracias a este trabajo hemos descubierto que la mayor correlación entre cálculos teóricos y experimentos se produce en moléculas en estado líquido. Esto se debe a que aún existen limitaciones en los métodos de cálculo a la hora de reproducir las condiciones de moléculas conjugadas en estado sólido, que es como se encuentran en las celdas solares convencionales. Por otro lado, el análisis estadístico avanzado ha permitido identificar las características de las moléculas que resultan en una absorción de luz eficiente, relacionados con su estructura y los átomos que las conforman”, comenta el investigador del ICMAB.

Con el objetivo de acelerar el cribado de nuevos materiales desde un punto de vista teórico, los autores del artículo demuestran que se pueden emplear modelos de aprendizaje automático (*machine learning*) y aproximaciones semiempíricas para realizar predicciones precisas disminuyendo el gasto computacional de los cálculos. Un menor gasto computacional implica realizar cribados moleculares rápidos y accesibles incluso desde un ordenador de sobremesa, lo cual incrementa la accesibilidad del cribado a cualquier laboratorio que así lo requiera.

Jun Yan, Xabier Rodríguez-Martínez, Drew Pearce, Hana Douglas, Danai Bili, Mohammed Azzouzi, Flurin Eisner, Alise Virbule, Elham Rezasoltani, Valentina Belova, Bernhard Döring, Sheridan Few, Anna A. Szumska, Xueyan Hou, Guichuan Zhang, Hin-Lap Yip, Mariano Campoy-Quiles and Jenny Nelson.  
**Identifying structure–absorption relationships and predicting absorption strength of non-fullerene acceptors for organic photovoltaics.** *Energy Environ. Sci.*, 2022, 15, 2958-

2973 DOI: 10.1039/D2EE00887D

**Marta García Gonzalo / CSIC Comunicación**